

возбуждает молекулу в состояние, из которого она с течением времени переходит в изучаемое состояние ионной пары. Второй импульс используется для зондирования состояния системы в определяемый задержкой между импульсами момент времени.

В экспериментах, выполненных совместно сотрудниками ИХКГ СО РАН и Фрайбургского университета, этот подход использовался для изучения динамики молекул I_2 при их фотовозбуждении в состояния ионной пары. При этом для зондирования состояния волнового пакета использовалось измерение «мгновенного» распределения по кинетической энергии относительного движения ионов I^+ и I^- в состоянии ионной пары с использованием техники измерения карт скоростей фотофрагментов (описание техники измерения карт скоростей (velocity map imaging) дано в работе [1]).

Данная работа посвящена моделированию фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул I_2 . В рамках нее проведено рассмотрение динамики с точки зрения классической и квантовой механики. Основные цели моделирования – описать динамику внутримолекулярных процессов и получить распределение по кинетической энергии относительного движения ионов в возбуждаемых состояниях ионной пары как функцию времени, что позволит сравнить эти данные с экспериментально полученными. Все численные расчеты проведены с помощью системы Wolfram Mathematica.

При классическом описании движения система была рассмотрена в виде точечной частицы, находящейся в потенциале, соответствующем изучаемому состоянию ионной пары. Процесс ее появления в данном состоянии рассматривался как экспоненциальный распад из состояния, возбуждаемого излучением. Описывая движение частицы с помощью классических законов, была получена зависимость распределения по кинетической энергии от задержки между импульсами, которая затем сравнивалась с экспериментальными данными [1].

Для квантовомеханического описания системы было проведено моделирование движения волнового пакета при возбуждении молекулы из основного состояния в состояние ионной пары. Распространение волнового пакета рассчитывалось с помощью метода расщепления экспоненциального оператора (exponential split operator method) [2]. Интегрируя часть пакета с низкой кинетической энергией, была получена зависимость количества частиц с низкой кинетической энергией в зависимости от задержки между импульсами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-53-12025).

Список публикаций:

- [1] Eppink A. T. J. B., Parker D. H. // *Rev. Sci. Instrum.* – 1997. – V. 68, № 9. – C.3477 - 3484.
- [2] Feit M.D.; Fleck J.A., Jr.; Steiger A. // *J. Comput. Phys.* – 1982. – V. 47, №3. – C.412 - 433.
- [3] von Vangerow J. et al. // *Physical Chemistry Chemical Physics.* – 2016. – T. 18. – №. 28. – C.18896-18904.

Получение оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке

Ершов Кирилл Сергеевич

Новосибирский государственный университет

Бакланов Алексей Васильевич, д.х.н.; Кочубей Сергей Александрович, к.ф.-м.н.

KErshov93@gmail.com

Возможность генерации полупроводниковых материалов (диоксид титана, триоксид вольфрама и т.д.) представляет большой практический интерес [1]. Реализация этого позволит исследовать элементарные фотопроцессы, связанные с применением этих материалов в водородной энергетике и фотокатализе, с использованием высокоэффективных методов исследования [2].

В представленной работе предпринята попытка генерации оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке двумя методами: из летучих соединений гексакарбонила вольфрама и изопропоксида титана и абляцией титановой и вольфрамовой фольги. Для фотовозбуждения молекул и их комплексов использовалось излучение четвертой гармоники твердотельного Nd:YAG лазера на длине волны 266 нм.

В работе представлены результаты изучения фотохимических процессов, протекающих при УФ фотовозбуждении летучих соединений $W(CO)_6$ и $Ti(OC_3H_7)_4$ и их комплексов с кислородом, а также результаты двухлазерных экспериментов (метод абляции и метод фотодиссоциации летучих веществ в сочетании с фотоионизацией продуктов), полученные с помощью времяпролетной масс-спектрометрии. На рис. 1 в качестве примера приведены масс-спектры фотофрагментов, образующихся при возбуждении молекул $W(CO)_6$, и указывающие на образование атомов вольфрама и его оксида.

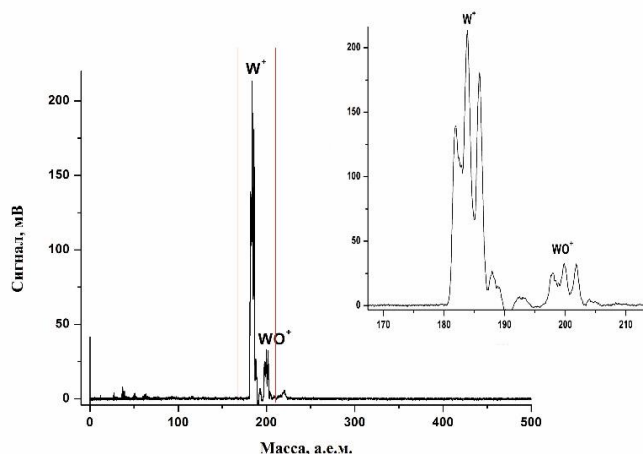


рис. 1. Масс-спектр фотофрагментов гексакарбонила вольфрама. На вставке показан увеличенный фрагмент спектра, содержащий пики иона вольфрама и его оксида.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-03-03204).

Список публикаций:

[1] Lling-Lling Tan, et al. // *Chem. Commun.* 2014. V 50. P. 6923—6926

[2] B. J. Whitaker, *Imaging in Molecular Dynamics: Technology and Applications*. 2003.

Исследование электрохимического поведения медного электрода, модифицированного методом высокоскоростного лазерного синтеза, в растворах с различными концентрациями глюкозы

Костенкова Ирина Сергеевна

Удмуртский государственный университет

Черенков Иван Анатольевич, к. б. н.

kostenkovai@bk.ru

В последние годы внимание исследователей различных специальностей привлекают материалы, полученные методами высокоскоростного лазерного синтеза (ВЛС). Использование данной технологии позволяет сформировать на поверхности материала развитый микрорельеф и каталитически активные функциональные группы [1]. В то же время растет число работ посвященных так называемым «нанозимам» - наноразмерным биомиметическим частицам катализирующим разнообразные биохимические реакции [2,3]. Важное место среди нанозимов занимают соединения меди, обладающие каталазоподобной и пероксидазоподобной активностью [4]. Имеются сообщения о глюкозных сенсорах с использованием медьсодержащих наночастиц [4, 5].

Исходя из вышеизложенного, целью нашей работы стало исследование чувствительности к глюкозе медного электрода обработанного высокоинтенсивным лазерным облучением в режиме амперометрической детекции.

Рабочим электродом служил медный стержень диаметром 2 мм, торцевую часть которого выравнивали абразивной бумагой и полировали до зеркального блеска пастой ГОИ, обезжиривали ацетоном, а затем обрабатывали методом ВЛС при различных режимах мощности (лазер *L Designer F1*, Россия). После обработки электрод промывали фосфатно-солевым буферным раствором (ФСБ) (pH 7,2). Вспомогательным электродом служил графитовый электрод, а электродом сравнения хлорсеребряный, относительно которого приведены все значения потенциалов.